



Quantenmechanik und Chemie: Die Bedeutung von Nichtlokalität und Verschränkung für Moleküle**

Aris Chatzidimitriou-Dreismann* und Markus Arndt*

Die Vorhersagen der Quantenphysik scheinen häufig intuitiven und „vernünftigen“ Annahmen darüber zu widersprechen, wie sich die Welt nach der klassischen Physik verhalten sollte. Jedoch wurden bisher alle diese Vorhersagen auf mikroskopischer Ebene bestätigt. Ziel des kürzlich ins Leben gerufenen EU-Netzwerkes QUACS^[1] ist es, die „merkwürdigen“ Quanteneigenschaften Nichtlokalität, Verschränkung und Dekohärenz auf komplexe Systeme wie große Moleküle oder gar kondensierte Materie anzuwenden, sie zu untersuchen und zu kontrollieren. Zwei Beiträge des Workshops sollen hier diskutiert werden.

Chemiker haben schon vor einigen Jahrzehnten den Begriff der delokalisierten Wellenfunktion übernommen, z.B. bei der Beschreibung der chemischen Bindung. Es ist jedoch darauf hinzuweisen, dass die Bedeutung der Quantenphysik für die Chemie weit über das hinaus geht, was im Allgemeinen in Lehrbüchern steht, und das auf einer größeren Längenskala als erwartet. Bereits 1999 wurde die Bedeutung der Nichtlokalität in einem Streuexperiment mit Fullerenmolekülen gezeigt.^[2] Die Entwicklung neuer Materiewellen-Interferometer^[3] hat es nun erlaubt, klare Beweise für die De-Brogliesche Wellennatur von *meso*-Tetraphenylporphyrin (TPP) und dem Fluorfulleren C₆₀F₄₈ zu erbringen (Abbildung 1).^[4]

TPP (C₄₄H₃₀N₄, 614 g mol⁻¹) ist das erste organische Molekül, dessen Wellennatur gezeigt werden konnte. Den Porphyrin-Kern findet man als Strukturlement in vielen komplexen biologischen Strukturen wieder, z.B. Chlorophyll und Hämoglobin. In Bezug auf die Interferometrie ist anzumerken, dass TPP ein sehr flexibles und wenig symmetrisches Molekül ist, sodass Dekohärenz leichter zu beobachten sein sollte als an starren und kompakten Fullerenen. Mit 108 Atomen ist C₆₀F₄₈ (1632 g mol⁻¹) das zurzeit massivste und komplexeste Molekül, an dem die Interferenz von Materiewellen gezeigt werden konnte.

Die Interferenzapparatur steht in einer Vakuumkammer, um Verluste von Material und Sichtbarkeit der Interferenz zu vermeiden.^[3-5] Die Molekülstrahlen werden durch Sublimation in einem Ofen erzeugt (TPP: 690 K, C₆₀F₄₈: 560 K). Die Teilchengeschwin-

digkeiten in der Apparatur betragen 100–200 m s⁻¹, die De-Broglie-Wellennänge beträgt also rund 2–5 pm. Die Moleküle passieren drei Goldgitter mit einer Periodizität von 990 nm und Öffnungen von rund 470 nm. Während jedes Molekül beim Eintritt in das Interferometer noch als streng lokalisiert betrachtet werden kann, sorgt das erste Gitter für die notwendige transversale Kohärenz und delokalisiert jedes Molekül am zweiten Gitter über mehr als 1 µm, zwei Gitterperioden oder das tausendfache des Moleküldurchmessers. Die Interferenz hinter dem zweiten Gitter führt zu einer Verteilung der Molekuldichte (Beugungsringe), die mit dem dritten Gitter vermessen wird. Die Interferenz bleibt bestehen, solange jedes interferierende Molekül gut von seiner Umgebung isoliert ist. Zusammenstöße mit Gasresten in der Apparatur verschränken die interferierenden Moleküle mit dem Gas und führen so zur Unterdrückung eines Teils der Quanteninterferenz.^[5]

Der zweite Workshop-Beitrag, der hier diskutiert werden soll, betrifft die kurzfristige Verschränkung von Protonen mit benachbarten Teilchen wie anderen Protonen oder Elektronen für weniger als eine Femtosekunde. Verschränkung ist ein reines Quantenphänomen, das nicht mit der klassischen Mechanik beschreibbar ist. Es wurde mit einer neuen Technik der Compton-Neutronenstreuung (NCS)^[6-8] und kürzlich auch mit Hilfe der Compton-Elektronen-Protonenstreuung (ECS) untersucht.^[8,9] Diese neuen experimentellen Techniken öffnen das Zeitfenster für die

[*] Prof. Dr. A. Chatzidimitriou-Dreismann
Institut für Chemie, Stranski-Laboratorium
Technische Universität Berlin
Straße des 17. Juni 112
10623 Berlin (Deutschland)
Ao. Univ.-Prof. Dr. M. Arndt
Institut für Experimentalphysik
Universität Wien
Boltzmanngasse 5
1090 Wien (Österreich)

[**] Zweiter Workshop über „Entanglement and Decoherence of Complex Quantum Systems“, Erwin-Schrödinger-Institut, Wien, 5.–7. September 2003. Der Workshop fand im Rahmen des EU-Netzwerks QUACS (Quantum Complex Systems) statt.

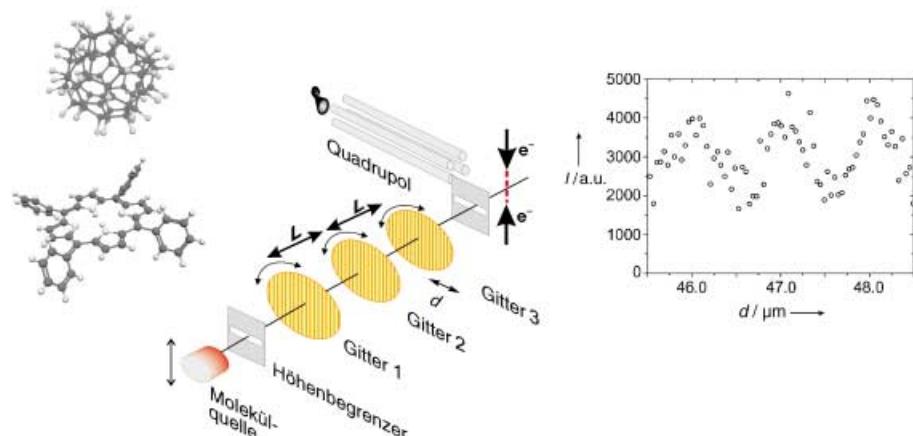


Abbildung 1. Mithilfe dieses Interferometers lässt sich zeigen, dass auch große Moleküle Welleneigenschaften zeigen, indem man Gitter 3 um d senkrecht zum Strahl verschiebt.

Untersuchung der Quantendynamik von Protonen und ermöglichen so das Beobachten dramatischer Quanteneffekte auf der Attosekundenskala.^[6–9] Vor einigen Jahren wurde in NCS-Experimenten an Wassermolekülen überraschenderweise eine reduzierte Protonenstreuintensität festgestellt.^[6] Dieser Effekt konnte in einer Vielzahl von Materialien reproduziert werden: organische Flüssigkeiten, Polymere, Amphiphile und Metallhydride. Anscheinend werden die Wasserstoffkerne in all diesen Verbindungen zeitweise „unsichtbar“ für die als Sonden eingesetzten Neutronen. Diese Beobachtungen auf der Attosekundenskala konnten mit einer unabhängigen Methode (ECS) bestätigt werden. Bei der Untersuchung eines festen Polymers bei Raumtemperatur ergaben die Experimente mit Elektronen (Australian National University in Canberra) die gleiche verringerte Intensität wie ergänzende Neutronenexperimente (ISIS-Neutronenquelle in Großbritannien).^[8–9] Die Übereinstimmung der Ergebnisse ist überraschend, da die beiden

Sonden (Elektronen und Neutronen) mit Protonen durch völlig unterschiedliche Kräfte wechselwirken: die elektromagnetische bzw. die starke Wechselwirkung. Aufgrund der großen übertragenen Energie lassen sich mit diesen Experimenten auch elementare chemische Reaktionen auf der Attosekundenskala studieren, insbesondere das Dissoziieren der kovalenten C-H-Bindung.

Die beschriebenen Ergebnisse zeigen, dass Atomkerne im Gegensatz zur landläufigen Meinung unter Chemikern nicht immer als klassische Massenpunkte beschrieben werden können.

Tagungsberichte in der *Angewandten Chemie* sollen Statusbeschreibungen eines Gebiets und nicht Auflistungen von Vorträgen bieten. Autoren werden von der Redaktion eingeladen, nur über das aus ihrer persönlichen Sicht heraus interessanteste zu berichten.

- [4] L. Hackermüller, S. Uttenthaler, K. Hornberger, E. Reiger, B. Brezger, A. Zeilinger, M. Arndt, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 090408.
- [5] K. Hornberger, S. Uttenthaler, B. Brezger, L. Hackermüller, M. Arndt, A. Zeilinger, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *90*, 160401.
- [6] C. A. Chatzidimitriou-Dreismann, T. Abdul-Redah, R. M. F. Streffer, J. Mayers, *Phys. Rev. Lett.* **1997**, *79*, 2839.
- [7] C. A. Chatzidimitriou-Dreismann, T. Abdul-Redah, B. Kolarić, *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 11945.
- [8] C. A. Chatzidimitriou-Dreismann, M. Vos, C. Kleiner, T. Abdul-Redah, *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 057403.
- [9] „Entangled Protons in a Solid Polymer“, *Physics Today* **2003**, *56* (9), 9.